— 量子力学特論レポート問題 — 〆切 2001.2.20 教務室

A. 質量 m, 電荷 $z_j e$ $(j = 1, \cdots, N))$ を持つ系の基本法則としてローレンツ力による粒子の運動方程式

$$
\begin{aligned}
m\ddot{\vec{r}}_j &= z_j e(\vec{E}_j + \dot{\vec{r}}_j \times \vec{B}_j) \\
\vec{E}_j &= E(\vec{r}_j), \quad \vec{B}_j = \vec{B}(\vec{r}_j)
\end{aligned}
$$

と次の Maxwell 方程式を考える。

$$
\begin{aligned}
\mathrm{rot}\,\vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial \vec{t}} &= 0 \\
\mathrm{rot}\,\vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} &= \vec{j} \\
\mathrm{div}\,\vec{D} &= \rho \\
\mathrm{div}\,\vec{B} &= 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\vec{D} &= \epsilon_0 \vec{E} \\
\vec{H} &= \frac{1}{\mu_0}\vec{B}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\rho(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^{N} z_i e \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\
\vec{j}(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^{N} z_i e \dot{\vec{r}}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)
\end{aligned}
$$

この系の場の古典論としてクーロンゲージにおけるハミルトニアン演算子を書き正準方程式が、上記の方程式系と同値であることを確認せよ。ただし記述は自己完結的にせよ。

B. 電子密度 n のクーロン相互作用する系の粒子あたりの全エネルギーをハートリーフォック近似のもとで求めよ。ただし系には一様な正電荷が存在し電気的中性の条件が成り立っているとせよ。

C. 水素類似原子のエネルギー固有値と固有関数についてその縮退に特に注意して記述せよ。ただし記述は自己完結的にせよ。

I. 1次元の散乱問題を積分方程式の方法で議論しよう。

I.1 散乱ポテンシャルをVとしてハミルトニアンを$H = H_0 + V$と書いたとき、

$$\Psi = \Psi_0 + G_0 V \Psi$$

が シュレディンガー方程式 $H\Psi = E$ を満たすことを全ての演算子を行列として扱い形式的に示せ。ただし Ψ_0 は斉次解(ポテンシャルのないときの波動関数) であり $H_0\Psi_0 = E\Psi_0$ であり G_0 はポテンシャルのないときのグリーン関数$G_0 = (E - H_0)^{-1}$ である。

I.2 [I.2] の積分方程式をある境界条件のもとで書き下すと以下のようになる。

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\frac{i}{2k}\int_{-\infty}^{\infty} dy V(y) e^{ik|x-y|}\Psi(y)$$

ポテンシャルを$V(x) = -g\frac{\hbar^2}{2m}\delta(x)$ として $x > 0$ と $x < 0$ の場合の波動関数を求めよ。

I.3 透過率 T と反射率 R を求めよ。

II. フェルミ粒子の場の演算子を次のように定義する。($\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$)

$$\psi(\vec{r}) = \sum \phi_i(\vec{r}) c_i$$

II.1 $\phi_i(\vec{r})$ は完全系をなすが、これはどういうことか記述せよ。

II.2 別の完全系 $\tilde{\phi}(\vec{r})$ により $\tilde{\psi}(\vec{r}) = \sum_i \tilde{\phi}_i(\vec{r})\tilde{c}_i$ と展開したとき以下の関係式を示せ。

$$[\tilde{c}_i, \tilde{c}_j^\dagger[_{\mp} = \delta_{ij}$$

II.3 2粒子状態 $|2\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle$ に関して相互作用

$$H_i = \frac{1}{2}\int d^3r\ d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')v(\vec{r} - \vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r})$$

の期待値を計算しよう。$(v(\vec{r}) = v(r))$

II.3.1 以下の式をまず示せ。

$$\hat{\psi}(\vec{r})|2\rangle = \phi_1(\vec{r})\ c_2^\dagger|0\rangle - \phi_2(\vec{r})\ c_1^\dagger|0\rangle$$

II.3.2 同様に $\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r})|2\rangle$ を計算せよ。

II.3.3 $\langle 2|H_i|2\rangle$ を計算せよ。ただし J, K を次のように定義する。

$$\begin{aligned} J &= \int d^3r\ d^3r' |\phi_1(\vec{r}')|^2 |\phi_2(\vec{r})|^2 v(\vec{r}-\vec{r}') \\ K &= K^* = \int d^3r\ d^3r' \phi_1^*(\vec{r}')\phi_2(\vec{r}')\phi_2^*(\vec{r})\phi_1(\vec{r}) v(\vec{r}-\vec{r}') \end{aligned}$$

III. 相互作用の無い電子系での電子配置をまず考えスピンと角運動量を保存する相互作用の効果を摂動論で考える。

III.1 相互作用の無いとき電子配置 $(2p)^1(3p)^1$ の縮退度はいくつか

III.2 多重項の表記 ^1D とは何を意味するか説明せよ。

III.3 相互作用により電子配置 $(2p)^1(3p)^1$ から生じる多重項を ^{2S+1}L の形でその縮退度とともに示せ。

IV. 電荷 $z_je,\ j=1,2,\cdots$ を持つ系における 1 次の過程の光遷移の行列要素 M_{ba} を双極子近似下で考える。

$$M_{ba} = \langle b|\sum_j \frac{i\hbar z_j e}{m}\vec{e}_{k\sigma}\cdot\vec{\nabla}_j|a\rangle = \int \prod d\vec{r}_i \Psi_b^*(\{\vec{r}_i\})\left(\sum_i \frac{i\hbar z_i e}{m_i}(\vec{e}_{\vec{k}\sigma}\cdot\vec{\nabla}_i)\right)\Psi_a(\{\vec{r}_i\})$$

ただし $|a\rangle,\ |b\rangle$ は粒子系の非摂動系の固有状態

$$H_p|a\rangle = E_a|a\rangle, \quad H_p|b\rangle = E_b|b\rangle$$

であり、粒子系のハミルトニアンは次のとおりである。

$$H_p = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_j + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{i<j}\frac{z_i z_j e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

IV.1

$$[H_p, \vec{r}_j] = -\frac{\hbar^2}{m}\vec{\nabla}_j$$

を導け。

IV.2 $[H_p, \vec{r}_j]$ の 状態 a, b 間での行列要素を計算し、次の式を示せ。

$$\langle b|\vec{\nabla}_j|a\rangle = \frac{m}{\hbar^2}(E_a - E_b)\langle b|\vec{r}_j|a\rangle$$

IV.3

$$M_{ba} = -i\omega_{ba}\mu^T$$

と書いたとき μ^T を求めよ。ただし $\hbar\omega_{ba} = E_b - E_a$ である。